1.7 臨界現象とスケーリング

1.7.1 臨界指数、ユニバーサリティ・クラス

今までの平均場近似やランダウ理論での相転移では、$T = T_\mathrm{c}$ で比熱に飛びがあったり、帯磁率が発散したりした。これらの物理量は自由エネルギーの 2 階微分であるので、この場合は 2 次相転移である。帯磁率は $\chi \propto 1/|T - T_\mathrm{c}|$ という形で発散した。

平均場近似でなくても、2 次元イジングモデルでは厳密に相転移を調べることができるし、3 次元イジングモデルなどでは数値計算によるシミュレーションによって相転移が調べられる。またもちろん実験でも、強磁性転移、ヘリウムの超流動転移、金属の超伝導転移などで相転移付近の比熱や帯磁率を測定することができる。しかし、実験や理論で測定される比熱や帯磁率の振舞いは必ずしも、平均場近似で得られたものではない。むしろ平均場近似とは異なる場合がほとんどである。

そのため、各種相転移を特徴づけるものとして臨界指数というものが定義されて、調べられている。具体的には $T = T_\mathrm{c}$ 付近における物理量の特異性として

$$\begin{array}{rccll} \text{比熱} & C & \propto & |T-T_\mathrm{c}|^{-\alpha} & \cdots \quad T > T_\mathrm{c} \\ & & & |T-T_\mathrm{c}|^{-\alpha'} & \cdots \quad T < T_\mathrm{c} \\ \text{秩序変数(自発磁化)} & M & \propto & |T-T_\mathrm{c}|^{\beta} & \cdots \quad T < T_\mathrm{c} \\ \text{帯磁率} & \chi & \propto & |T-T_\mathrm{c}|^{-\gamma} & \cdots \quad T > T_\mathrm{c} \\ & & & |T-T_\mathrm{c}|^{-\gamma'} & \cdots \quad T < T_\mathrm{c} \\ T_\mathrm{c}\text{での秩序変数} & M & \propto & H^{1/\delta} & \cdots \quad T = T_\mathrm{c} \end{array} \tag{1}$$

と考えて、べき乗の指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ を臨界指数と定義している。このような物理量の特異性が現れることを、臨界現象と呼ぶ。具体的な臨界指数の例は表にまとめた(講義で配った)。

これらの数値をみると、一見バラバラのように見えるが、よくみると似た臨界指数が得られる場合のグループ分けができるようにみえる。たとえば強磁性転移だと、もちろん物質が違うのでいろいろなミクロのパラメータは異なっている。そのため T_c の値は物質ごとにバラバラである。しかし T_c が大きく異なっていても、臨界指数は同じような値になる。つまり、細かいミクロなハミルトニアンや相互作用の違いには無関係に、臨界指数は決まっているように見えるのである!

このように、ほぼ同じ臨界指数をもつ相転移のグループを「ユニバーサリティ・クラス」という。たとえば、次元の違うモデル(2 次元イジングモデルと 3 次元イジングモデル)は、違うユニバーサリティ・クラスに属している。またイジングモデルとハイゼンベルグモデルでも違うユニバーサリティ・クラスに属している。逆にいうと、同じ次元や同じハミルトニアンの対称性であるばあい、細かいモデルパラメータによらず、臨界指数は決まっているということを示唆している。また、系の異方性つまり x 方向と y 方向の相祖が用が異なっていても、2 次元ならば 2 次元のユニバーサリティ・クラスに属することもしられている。

このことは、相転移にともなう臨界現象には、個別のモデルを超えて全体を統一するような理論的枠組みが存在することを示唆している。

上の式はすべて「比例する」という形で臨界指数が定義されているが、$T > T_\mathrm{c}$ と $T < T_\mathrm{c}$ の比例係数の比 A_+/A_- についても、ユニバーサルな量があることが考えられている。

1.7.2 スケーリング関係式

さらに、表をよく見ると、臨界指数の間に簡単な関係式が成り立つことがわかる。たとえば

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{2}$$

という関係が、どの相転移であるかにかかわらず成立していることが分かる。（もちろん実験データは誤差があるので、絶対とは言い切れないが、実験精度をあげれば必ずこの関係式に近づくと信じられている。）

このほかにもいくつかのスケーリング関係式が知られている。

$$\delta = 1 + \frac{\gamma}{\beta} \tag{3}$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ の間に 2 つの関係式が存在することが本当だとすると、独立なパラメータは 2 つということになる。

これ以外に相関長に関する臨界指数も定義できる。相関長とは相関関数

$$g(r) \equiv \langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi} \tag{4}$$

としたときの ξ のことである。($r \equiv |r_i - r_j|$) 分母は通常は次元 d を用いて $d-2$ であるが、η という余分な指数がついている。この η も臨界指数の 1 つで「異常次元」と呼ばれている。指数関数の方は、距離 r だけ離れると、スピン間の相関が指数関数的に減衰することを示している。その特徴的な長さが ξ であり、これを相関長という。相関長くらい距離が離れると、相関がなくなるという意味である。

相関長 ξ は、一般的に臨界温度に近づくと発散する。その発散の程度を

$$\begin{array}{llll} \text{相関長} \quad \xi & \propto & |T-T_\mathrm{c}|^{-\nu} & \cdots \quad T > T_\mathrm{c} \\ & & |T-T_\mathrm{c}|^{-\nu'} & \cdots \quad T < T_\mathrm{c} \end{array} \tag{5}$$

と表したものが、相関長に関する臨界指数 ν である。この ν に関してもスケーリング関係式があり、

$$\gamma = \nu(2-\eta) \tag{6}$$

1.7.3　ハイパースケーリング

これまでは次元 d が現れていなかったが、d を含んだ形でのスケーリング関係式もある。

$$\begin{array}{rcl} 2-\alpha & = & \nu d \\ \delta & = & \dfrac{d+2-\eta}{d-2+\eta} \end{array} \tag{7}$$

これらは、とくにハイパースケーリング関係式と呼ばれている。ただし、ハイパースケーリング関係式は、必ずしも成立するとは限らないと考えられている。実際、平均場近似は次元によらない理論なので、その結果としてでてくる平均場近似による臨界指数はハイパースケーリング関係式を満たしていない。

1.7.4　スケーリング仮説

上記のスケーリング関係式を『証明』する 1 つの仮説がある。これを以下で説明しよう。まず

$$t \equiv \left| \frac{T-T_\mathrm{c}}{T_\mathrm{c}} \right| \tag{8}$$

として無次元化された相転移温度近傍の温度 t を定義する。さらに無次元化された磁場を h と書くことにする。

自由エネルギー F は示量性の物理量なので体積に比例するが、自由エネルギー密度 $f = F/V$ を考えれば、物質固有な量となる。さらに f のうち、相転移温度近傍で特異性をもつ部分を f_s と表すことにする。添え字の s は特異性 (singularity) の略である。つまり

$$F/V = f = f_\mathrm{s} + f_\mathrm{normal} \tag{9}$$

ということである。
　さて、仮説として特異な部分 $f_{\rm s}$ が

$$f_{\rm s} \propto t^x f(h/t^y) \tag{10}$$

と表されると仮定しよう。ここで $f(h/t^y)$ は変数 h/t^y を持つ 1 変数の或る関数であるとする。これをスケーリング仮説という。ここで磁場 h が h/t^y という形を通してのみ $f_{\rm s}$ に現れるというところがミソである。べき乗の指数 x と y は後で決めるが、$f(h/t^y)$ の関数形は問題にならない。
　もとの分配関数でみれば、磁場 H は $g\mu_{\rm B}H/k_{\rm B}T$ の形で現れているので、温度 t のべき乗 h/t^y という形にはなりそうにない。しかし臨界現象では特異性として h/t^y が現れるというのが大胆な仮説である。
　とりあえず進むと、まず磁場 0 での比熱の異常を見てみよう。まずエントロピーは f の温度微分なので、特異性を持つ部分だけを取り出して考えると

$$s = -\frac{\partial f_{\rm s}}{\partial T} \propto x t^{x-1} f(0) \tag{11}$$

となる。（小文字の s は単位体積当たりという意味である。）磁場が 0 なので $f\,(0)$ は定数である。もう 1 階微分したものが比熱になるので

$$c = T\frac{\partial^2 f_{\rm s}}{\partial T^2} \propto x(x-1)t^{x-2}f(0) \propto t^{x-2} \tag{12}$$

この得られた式と比熱の臨界指数 α の定義と比べると、$x = 2 - \alpha$ としておけばよいことがわかる。
　つぎに磁気モーメントに関する臨界指数をみてみよう。磁化は自由エネルギーの磁場に関する 1 階微分であるから、

$$m = \frac{\partial f_{\rm s}}{\partial h} \propto t^{x-y} f'(h/t^y) \tag{13}$$

である。ここで $h = 0$ とおくと、$m \propto t^{x-y}$ となるので、臨界指数 β は

$$\beta = x - y \tag{14}$$

が得られる。さらにもう 1 階磁場について微分すれば帯磁率が得られるので

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} \propto t^{x-2y} f'(h/t^y) \tag{15}$$

さらに $h = 0$ とおけば、帯磁率の臨界指数が

$$\gamma = -x + 2y \tag{16}$$

であることになる。
　以上で、未知変数が x, y の 2 つであったが、臨界指数 α, β, γ の 3 つが得られたことになる。したがって、これらの式から x, y を消去すると α, β, γ の関係が得られる。実際、$x = 2 - \alpha$ と (14) 式から $y = 2 - \alpha - \beta$ として (16) 式に代入すると、スケーリング関係式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{17}$$

が得られる。こうして、１つの関数 $f(h/t^y)$ という依存性を持つという仮定だけからスケーリング関係式が「導き出された」ことになる。
　さらに、臨界指数 δ についても考えてみよう。これは $T = T_{\rm c}$、つまり $t = 0$ のときの磁気モーメントと磁場との関係である。磁気モーメント m は上の（13）式で求めたが、この式ですぐに $t = 0$ とおくと、関数 f' の中の引数が発散してしまう。しかし実際に左辺の m が発散するわけではないので、以下のように考えればつじつまが合うことになる。つまり関数 $f'(h/t^y)$ が、引数の大きいところで、

$$f'(h/t^y) \propto (h/t^y)^{\frac{x-y}{y}} \tag{18}$$

と振る舞うはずであると考えるのである。こうすれば右辺は発散せずに

$$m \propto t^{x-y} f'(h/t^y) \propto t^{x-y}(h/t^y)^{\frac{x-y}{y}} = h^{\frac{x-y}{y}} \tag{19}$$

となるのである。この式から臨界指数 δ が $\delta = y/(x-y)$ と求まり、今まで得られた x, y の式を代入すると

$$\delta = \frac{y}{x-y} = \frac{2-\alpha-\beta}{\beta} = \frac{\beta+\gamma}{\beta} = 1 + \frac{\gamma}{\beta} \tag{20}$$

というスケーリング関係式が得られるのである。

1.7.5 相関関数に対するスケーリング仮説

相関関数に関連したスケーリング関係式もあったが、これについては相関関数に対してスケーリング仮説を考えることにより理解できる。相関関数 g を距離 r と共に、無次元化された温度 t と無次元化された磁場 h の関数であるとする。さらにスケーリング関数として

$$g(r,t,h) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g(r/\xi, h/t^y) \tag{21}$$

であると仮定する。ここで ξ は以前でてきた相関長で、磁場 h については自由エネルギーのときと全く同じ依存性 h/t^y を仮定することにする。つまり $y = 2-\alpha-\beta$ である。

さて、帯磁率と相関関数には関係がある。これは後で習う線形応答理論からでてくる関係であるが、ここでは先走って用いてしまうと

$$\chi = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\int d\boldsymbol{r} g(r,t,h=0) \tag{22}$$

を使う。この相関関数のところにスケーリング仮説で考えた関数形を代入し、$r/\xi = x$ という変数変換を行うと

$$\begin{aligned}
\chi &\propto \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\Omega_d \int r^{d-1} dr \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g(r/\xi, 0) \\
&\propto \int \xi^{2-\eta} x^{1-\eta} g(x,0) dx \\
&\propto \xi^{2-\eta}
\end{aligned} \tag{23}$$

が得られる。

ここで相関長が $T \to T_{\mathrm{c}}$ で発散するという臨界指数、$\xi \propto t^{-\nu}$ を考慮すれば $\chi \propto t^{-\nu(2-\eta)}$ となるので、帯磁率の臨海指数 γ との関係がついて

$$\gamma = \nu(1-\eta) \tag{24}$$

となる。これがもう１つのスケーリング関係式を与える。

1.7.6 ハイパースケーリングの仮説

最後に次元 d を含むハイパースケーリングについて考えよう。このためには、異常を示す自由エネルギー f_s が

$$f_s \propto \xi^{-d} \tag{25}$$

であると仮定する。この物理的意味はなかなか難しい。f_s は自由エネルギーの密度であるからそれに体積を掛けたものが全自由エネルギーになる。そこで自由エネルギーが異常になる部分として半径 ξ

のところだけだと考え、全自由エネルギーへの異常な部分の寄与は $f_s \times \xi^d$ であると考える。これが発散しないためには一定値とし、上の式を得る。

さて、これを認めてしまえば、右辺は $t^{\nu d}$ という依存性をもつ。一方、左辺は前の節で調べたように $t^x = t^{2-\alpha}$ である。このことからハイパースケーリング関係式

$$2 - \alpha = \nu d \tag{26}$$

が直ちに求まる。

また、ここで得られたスケーリング関係式から、α と γ が ν, η を用いて表すことができる。これを第 1 のスケーリング関係式に代入すると

$$\beta = \frac{1}{2}(2 - \alpha - \gamma) = \frac{1}{2}\left\{\nu d - \nu(2 - \eta)\right\} = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta) \tag{27}$$

が得られる。最後に δ についても同じように

$$\delta = 1 + \frac{\gamma}{\beta} = 1 + \frac{\nu(2-\eta)}{\frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta)} = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \tag{28}$$

を得る。

とくにこの節の仮説はわけがわからないかもしれないが、後で学ぶように「くりこみ群」というものを用いれば、ある程度自然に仮定 $f_s \propto \xi^{-d}$ が導きだせるので安心しておいてよい。